



TITLE:

# 機能性高分子材料の創生

AUTHOR(S):

三田, 文雄

---

CITATION:

三田, 文雄. 機能性高分子材料の創生. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 82-82

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251159>

RIGHT:

機能性高分子材料の創生  
Creation of functional polymeric materials

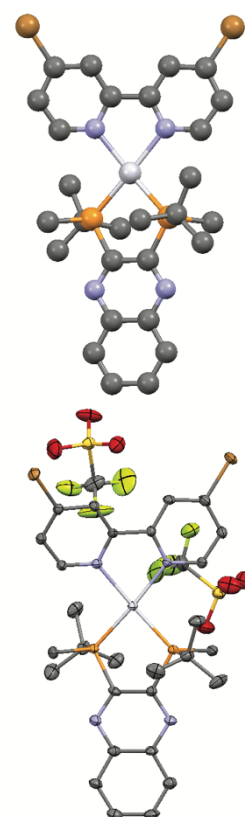
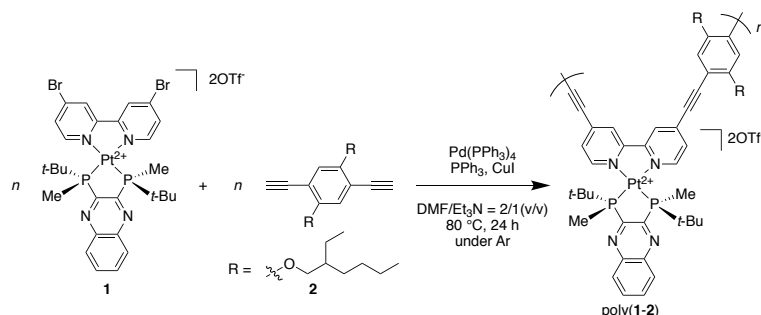
関西大学 化学生命工学部 化学・物質工学科 <sup>さん</sup>三田文雄

研究成果概要

Scheme 1 に示す, ジブロモビピリジンと(*R,R*)-QuinoxP\*が配位した 2 価の白金錯体モノマー**1** と, 1,4-ジエチニルベンゼン誘導体モノマー**2** との菌頭-萩原カップリング重合で得られるポリマー[poly(**1-2**)]は主鎖の規則正しいねじれに起因する円偏光二色性を示す。本研究では, poly(**1-2**)の高次構造解析の一環として, 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し, **1** の立体配座を Gaussian 16 プログラムを用いて最適化し, 単結晶 X 線構造解析により得られた構造と比較した。

**1** の DFT 計算(対アニオンは省略)により得られた安定構造および単結晶 X 線解析により得られた構造を Figure 1 に示す。いずれにおいても, **1** の白金中心と, 2 つの窒素原子および 2 つのリン原子からなる面は, 平面四角形構造から約 10°ねじれていることが確認された。これは, かさ高い *t*-ブチル基とメチル基で置換された不斉ホスフィン原子に起因すると考えられ, このねじれが poly(**1-2**)の主鎖のねじれを誘起していることが示唆された。

**Scheme 1.** The Sonogashira–Hagihara Coupling Polymerization of **1** with **2**.



**Figure 1.** Top: Possible conformer of monomer **1**, whose geometry was fully optimized by the DFT method [B3LYP/6-31G\* (C, H, N, P, Br)-LANL2DZ (Pt)], in which counter anions were omitted, and hydrogen atoms were hidden for clarity. Bottom: ORTEP view of **1** with 50% probability ellipsoids.

発表論文(謝辞あり)

M. Marumoto, T. Sotani, Y. Miyagi, T. Yajima, N. Sano, F. Sanda, *Macromolecules* in press (<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.0c00096>).